

Propiedades fractales de patrones de crecimiento en el modelo DLA mediante autómatas celulares

González-Estévez, J.^(1,2), Rivera-Ramírez, H.⁽²⁾, Tucci Kellerer, K.^(2,3)

- ⁽¹⁾ Laboratorio de Física Aplicada y Computacional, Decanato de Investigación, y Dpto. de Matemática y Física, Universidad Nacional Experimental del Táchira, San Cristóbal, C.P. 5001, Táchira, Venezuela
- ⁽²⁾ Postgrado en Física Fundamental, Área de Caos y Sistemas Complejos, Universidad de Los Andes, Facultad de Ciencias, Apartado Postal No. 26, La Hechicera, Mérida, C.P. 5251, Venezuela
- ⁽³⁾ Centro de Física Fundamental, Área de Caos y Sistemas Complejos, Universidad de Los Andes, Facultad de Ciencias, Apartado Postal No. 26, La Hechicera, Mérida, C.P. 5251, Venezuela

Resumen

Los fenómenos de agregación limitada por difusión describen el proceso mediante el cual partículas que se difunden libremente por un medio forman agrupaciones. Estos fenómenos pueden estudiarse utilizando simulación computacional, como en este caso donde empleamos un autómata celular y reglas dinámicas para investigar las propiedades fractales de los agregados en función de la fracción de ocupación inicial de partículas.

Palabras Clave: Física, Fractales, Simulación, Agregación, Difusión

Fractal properties of grow patterns at DLA model trough cellular automata

Abstract

Diffusion-Limited Aggregation (DLA) is upon on the formation of clusters by particles diffusing through a medium that jostles the particles as they move, it is studied trough an computer simulation using an cellular automaton and dynamical rules. Fractal properties of the clusters are investigated as function of the initial occupation fraction of the particles to be aggregated.

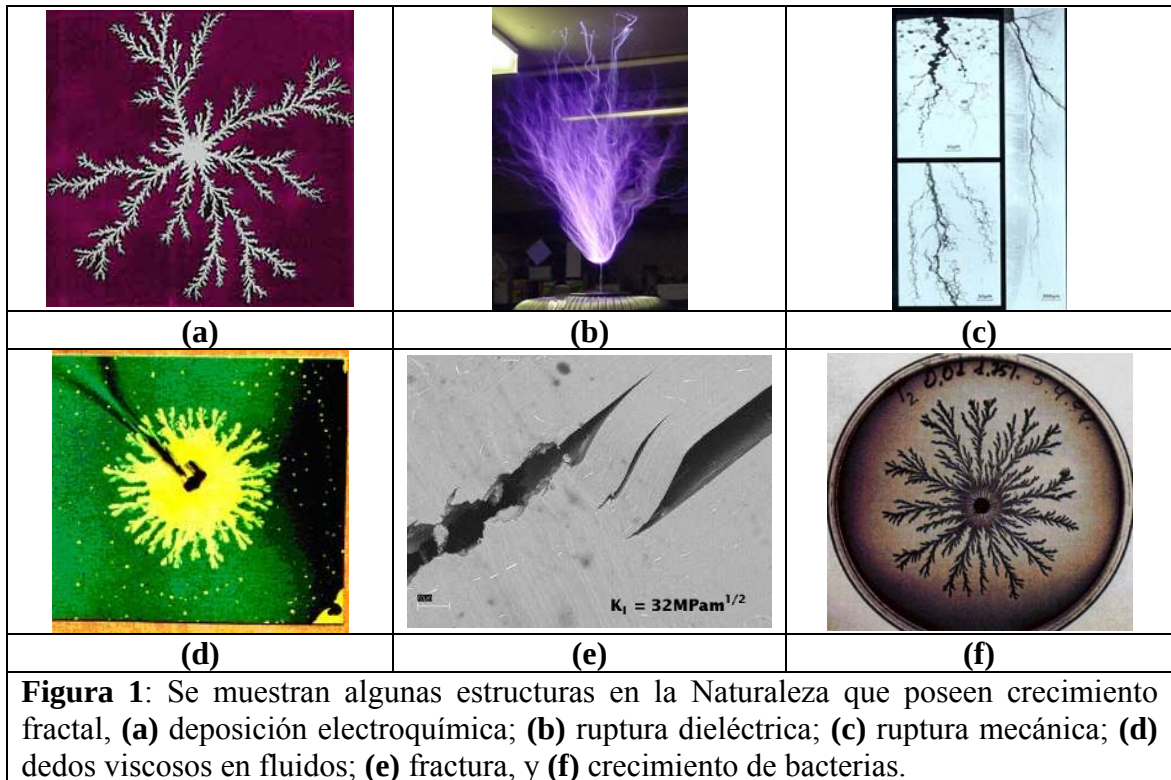
Key Words: Physics, Fractals, Simulation, Aggregation, Diffusion

Introducción

A principios de la década de 1980 se propuso un modelo que permitía crecer un objeto fractal: la agregación limitada por difusión (DLA). Esta fue la primera incursión en profundidad de la Física Estadística en el campo de los fenómenos de crecimiento y agregación. El primer modelo físico de crecimiento fractal que incorporó DLA fue introducido por Witten y Sander en 1981 [1-2]. Este modelo fue generalizado posteriormente por Niemeyer, Pietronero y Wiessmann [3] con un Modelo de Descarga Eléctrica, inspirado por las descargas en gases, que permitió aclarar las propiedades matemáticas subyacentes basadas en la ecuación de Laplace o ecuación de transporte. En este aspecto puede resultar sorprendente ver que el operador de Laplace, el cual usualmente conduce a propiedades de frontera bien definidas, en el caso de estos modelos conduce espontáneamente sus fronteras en estructuras fractales fuertemente irregulares. Se cree que estos fractales Laplacianos (véase Figura 1) capturan una variedad de propiedades esenciales de diversos fenómenos como la deposición electroquímica [5-6], rupturas dieléctricas y mecánicas [3], [7-8], dedos viscosos en fluidos [9-10], propagación de fracturas [11-13] y varias propiedades de coloides [14-16], crecimiento de bacterias [17-20], etc.

Nuestra investigación se focalizará en simular los patrones de crecimiento que aparecen en algunos de los fenómenos físicos, químicos y biológicos ya mencionados, cuando las partículas que forman parte de un medio entran en contacto con un agregado sólido al que se adhieren después de ceder calor al entorno. Los agregados que se observan tienen

estructura fractal, y en función de la fracción de ocupación inicial, η , de partículas queremos estudiar si existirá alguna relación entre ésta fracción de ocupación inicial, η , y la dimensión fractal, D_f .



En la sección Método describimos el modelo del autómatas celular (AC) bidimensional a emplear [3], inspirado en el modelo DLA [1], donde evoluciona un fluido con sus partículas en movimiento browniano, y que permita capturar la fenomenología. En la sección Resultados mostramos que existen dos regímenes, difusivo y reactivo, respectivamente y encontramos para cada uno de estos la relación funcional de la dimensión fractal, la cual se comporta en forma potencial y encontramos el valor crítico de la fracción de ocupación inicial, η_c , en la cual se separan estas dos regiones.

Finalmente en la sección Conclusiones mostraremos que el crecimiento fractal dependerá si el sistema se encuentra predominado por la difusión o la reacción, en función de la fracción de ocupación η de las partículas en las condiciones iniciales, y los problemas abiertos que persisten en la actualidad.

Método

Para construir un autómata celular (AC) [21] que desarrolle este tipo de crecimiento es necesario simular con un buen grado de aproximación el comportamiento del fluido con trayectorias brownianas alrededor de la semilla, así como el proceso de solidificación.

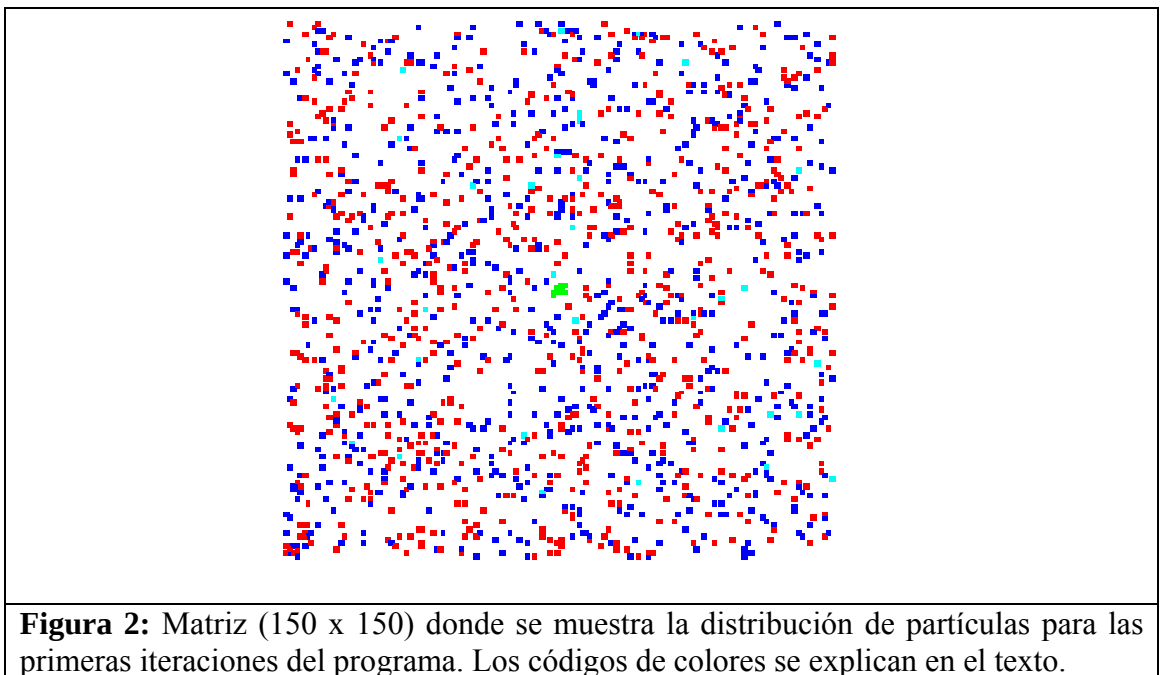
Con este fin cada celda del AC se define por un vector de estado $m(i,j)=(s_{ij}, g_{ij}, h_{ij})$, donde la primera componente, s_{ij} , indica si en la celda $m(i,j)$ hay o no una partícula en estado sólido formando parte del agregado en crecimiento (color verde en la simulación), es decir, $s_{ij}=1$, o $s_{ij}=0$, respectivamente. Se admite que, independientemente de la presencia de la partícula solidificada, dentro de la celda $m(i,j)$ pueden encontrarse hasta dos moléculas del medio, cuyas existencias vienen indicadas por las componentes binarias del vector de estado, g_{ij} y h_{ij} . Recordemos que nuestra meta es capturar la esencia fenomenológica.

Se dispone inicialmente de una única celda en estado sólido ubicada en el centro del autómata celular, alrededor de la cual evoluciona un fluido con sus partículas en

movimiento browniano. Cada vez que una de estas partículas (partículas $g_{ij}=1$) colinda con otra que forma parte del agregado en estado sólido, $s_{ij}=1$, se adhiere a ella y pasa a formar parte del agregado, y es en este momento se dice que se ha cristalizado. Según el cristal crece, la probabilidad de que una partícula de tipo g_{ij} alcance la parte central del mismo se vuelve improbable y es por esto que el agregado desarrolla una estructura ramificada y de estructura fractal.

El algoritmo

Se considera una fracción de ocupación inicial η de moléculas, con una distribución aleatoria de las moléculas tipo g_{ij} (color rojo) y h_{ij} (color azul) con una celda solidificada en el centro, $s_{nn/2,nn/2}=1$, (a fin de permitir la agregación). La coexistencia de moléculas g_{ij} y h_{ij} en una misma celda es permitida, y se representa en la simulación gráfica por un color azul celeste (Figura 2).



El AC es una matriz bidimensional de elementos, cuyas condiciones iniciales son que todas las celdas tienen su primera componente $s_{ij}=0$, a excepción de la semilla en el centro de la matriz, $s_{nn/2,nn/2}=1$, sobre la que se asentará el agregado. El resto de componentes del vector de estados se asignan en 1 con una probabilidad p , y 0 con probabilidad $(1-p)$, lo que significa que aproximadamente una fracción de p celdas estarán ocupadas con la especie g_{ij} y de manera similar para la componente h_{ij} .

La regla de transición local depende siempre para su evaluación en cada sitio de los cuatro vecinos más próximos (vecindad de von Neumann con bordes periódicos). Además, para simular tanto el movimiento errático de las partículas como el proceso de solidificación, es necesario definir las reglas dinámicas que serán implementadas en el autómatas celular:

Regla 1: Interacción gas-cristal. Si las dos primeras componentes de la celda actual están en estado $m_{ij}(t)=(0,1,h_{ij})$, y una de las celdas vecinas tiene una partícula agregada, entonces en la celda actual se produce una agregación a expensas de g_{ij} , de manera que el nuevo estado pasa a ser $m_{ij}(t+1)=(1,0,h_{ij})$, independientemente del valor de h_{ij} .

Regla 2: Mezcla de gas. Con probabilidad 1/2 intercambian sus valores, $g_{ij}(t+1) = h_{ij}(t)$ y $h_{ij}(t+1) = g_{ij}(t)$.

Regla 3: Transporte horizontal de gas. A la componente g de cada celda se le asigna el valor de la misma componente en la celda de la izquierda, $g_{ij}(t+1) = g_{i,j-1}(t)$, y a la componente h el valor de la misma componente en la celda a su derecha, $h_{ij}(t+1) = h_{i,j+1}(t)$.

Regla 4: Interacción gas-cristal. Se repite el paso 1.

Regla 5: Mezcla de gas. Se repite el paso 2.

Regla 6: Transporte vertical de gas. A la componente g de cada celda se le asigna el valor de la misma componente en la celda superior, $g_{ij}(t+1) = g_{i-1,j}(t)$, y a la componente h el valor de la misma componente en la celda inferior, $h_{ij}(t+1) = h_{i+1,j}(t)$.

Hemos elaborado un código computacional en lenguaje ForTran, y la interfaz gráfica que permitirá la visualización en tiempo real, se realiza mediante las subrutinas gráficas del visualizador PGPLOT [22].

Cálculo de la dimensión fractal (*box-counting*)

Se denomina fractal a todo objeto que posea estructura y autosimilaridad [23]. Introduciremos en este apartado la forma práctica más utilizada para estimar la dimensión fractal de un objeto. Definimos, primeramente, la dimensión fractal, D_f , como:

$$D_f = -\lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{\log(N_\delta)}{\log(\delta)}, \quad (1)$$

donde N_δ es el número de elementos de longitud característica δ necesarios para recubrir el conjunto estudiado. En la práctica, es en general imposible la realización del límite $\delta \rightarrow 0$ [24]. Para estimar la D_f se emplea el método *box-counting* [25]. Nótese que es posible escribir:

$$\log(N_\delta) = D'_f \log\left(\frac{1}{\delta}\right). \quad (2)$$

Si representamos en un gráfico al $\log(1/\delta)$ en el eje x y al $\log(N_\delta)$ en el eje y, el límite de la expresión (1) se puede aproximar por la pendiente de la recta de regresión. Escribimos D'_f en lugar de D_f , debido a que en principio no tienen porqué ser valores coincidentes. Uno proviene de un límite infinito, y otro se obtiene a partir de una recta de regresión.

Para el cálculo de la dimensión fractal con el algoritmo *box-counting* se utilizó el programa HarFa [26], que divide al cristal formado con una rejilla de cuadrados de lado δ . Se cuenta entonces el número de cuadrados que son ocupados por el cristal, N_δ , cantidad ésta que varía con el valor de δ . Hemos realizado para cada valor de densidad diez simulaciones empleando condiciones iniciales diferentes, y los valores de la dimensión fractal obtenidos son promediadas a fin de compensar las fluctuaciones estadísticas proveniente del generador de números aleatorios [17].

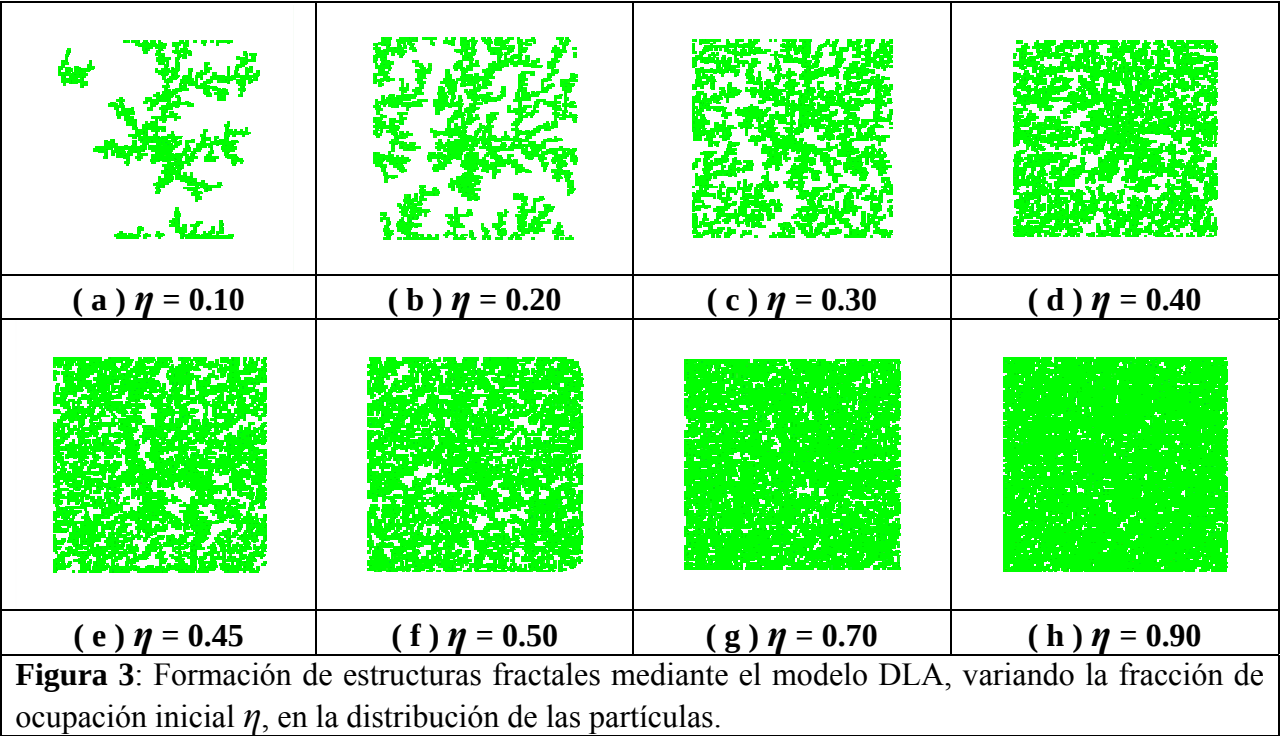
Resultados

Para la validación del programa se empleó una matriz de tamaño 100 x 100, asignándose una fracción de ocupación inicial η del 5%, a las partículas distribuidas aleatoriamente sobre la malla, empleando en cada caso diferentes semillas para el generador de números

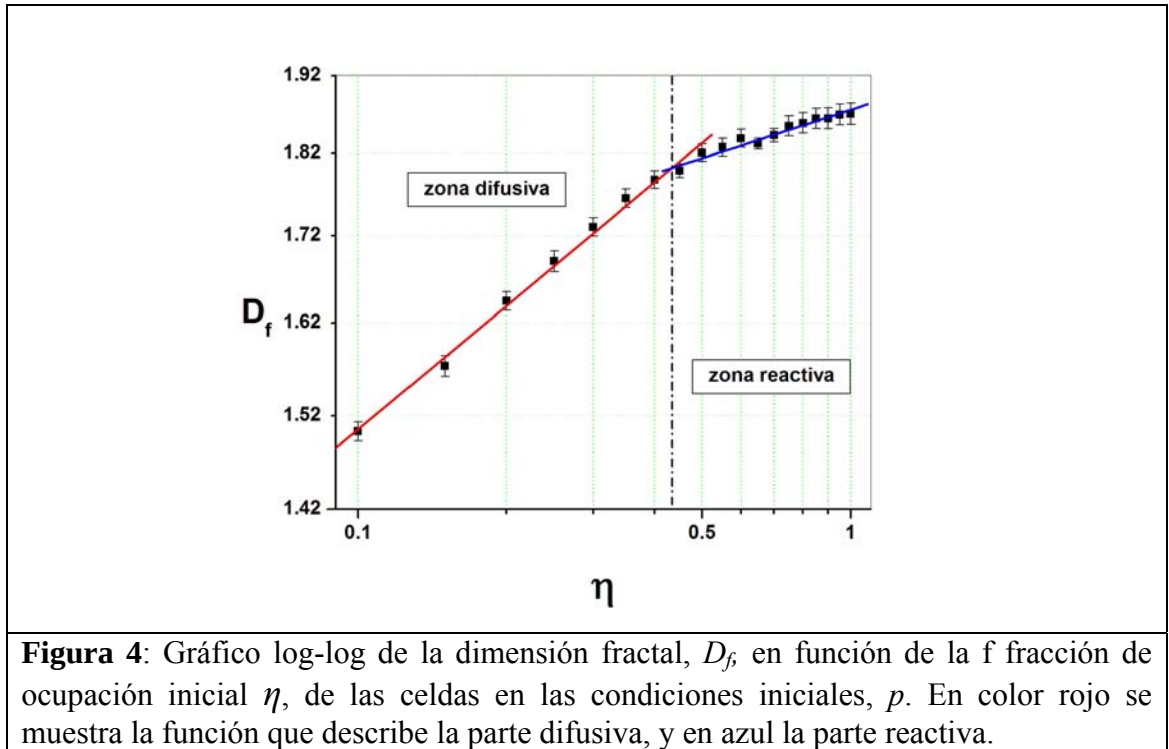
aleatorios; y se determinó que no existen diferencias significativas entre las diferentes realizaciones.

Dependencia de la dimensión fractal con la densidad

Para estudiar la relación existente entre la fracción de ocupación inicial η , y la dimensión fractal del DLA, se utilizó una matriz de mayor tamaño, (124 x 124), con 10 realizaciones por cada valor de η . La figura 3 muestra algunas de las estructuras DLA finales para diferentes valores de η .



La figura 4 muestra la relación existente entre la dimensión fractal de la estructura DLA en relación a la fracción de ocupación inicial η de partículas en el sistema. Note que en el gráfico log-log existen dos regiones diferenciadas por las pendientes de las rectas que interpolan los puntos obtenidos en las simulaciones.



Discusión de resultados

Dependencia de la dimensión fractal con la semilla inicial aleatoria

Se observa que al variar la semilla en el generador de números aleatorios y manteniendo constante la probabilidad p de ocupación, cambia el patrón de agregación del sistema simulado pero el valor de la dimensión fractal no presentan variaciones estadísticamente

significativas. El resultado final obtenido, según estos criterios, es de índole estadístico, y es por estos que para cada valor de p , se efectúa la simulación diez veces, y se obtiene un valor promedio.

Dependencia de la dimensión fractal con la densidad

En la figura (3) observamos que a medida que se aumenta el valor de la fracción de ocupación inicial η , la estructura formada para valores bajos de η , figuras (3a) – (3d) presentan patrones de crecimiento similares a los de la deposición electroquímica o al crecimiento de bacterias, figuras (1a) y (1f); pero al aumentar η , llegamos a un punto en que la estructura final se va pareciendo más a un medio poroso, figuras (3e) – (3h). Esta diferencia es originada porque para valores bajos de la fracción de ocupación inicial η , el fenómeno de agregación está controlado principalmente por el proceso difusivo. En cambio al aumentar la fracción de ocupación inicial η de las partículas, éstas no pueden difundirse libremente por mucho tiempo y el control de la agregación pasa a ser controlado por el proceso reactivo.

Esta diferencia en las características de los patrones finales se ve reflejada en el cambio de pendiente en el gráfico log-log de la figura (4). Para ambos casos se encuentra una ley de potencia que relaciona la fracción de ocupación inicial η , con la dimensión fractal D_f , $D_f = k \eta^\beta$, donde, k es una constante de proporcionalidad y β es el exponente que caracteriza a la ley de potencias.

Para el régimen difusivo $k = 1.995952 \pm 0.010938$, y $\beta = 0.1238 \pm 0.0039$; obteniéndose la siguiente relación potencial,

$$D_f = 1,99595(\eta_D)^{0,1238}, \quad (3)$$

donde (η_D) represente la fracción de ocupación inicial en la fase difusiva.

Para el régimen reactivo $k = 1,874131 \pm 0.003298$, y $\beta = 0.04844 \pm 0.00374$; obteniéndose la relación potencial,

$$D_f = 1,874131(\eta_R)^{0,04844}, \quad (4)$$

donde (η_R) represente la fracción de ocupación inicial en la fase reactiva. La intersección de estas dos rectas en el gráfico log-log, nos permite obtener el valor de la fracción crítica de ocupación inicial, η_C , que separa las fases difusiva y reactiva de nuestro modelo. Analíticamente encontramos que este valor es $\eta_C = (0.4333 \pm 0.0581)$.

Conclusiones

- 1.) Gracias a la forma como cambia la dimensión fractal del agregado final, hemos logrado separar los fenómenos DLA según predomine el proceso difusivo o el proceso reactivo en el control de la formación del agregado.
- 2.) Se ha encontrado que la relación entre la fracción de ocupación inicial η de partículas y la dimensión fractal del agregado sigue una ley de potencias con exponentes característicos diferentes según se encuentre en el régimen difusivo o reactivo.

- 3.) En ambos escenarios la dimensión fractal aumenta, siendo más acusado su crecimiento en la región difusiva, el cual disminuye una vez que la densidad crítica de partículas η_c a ser agregadas, es alcanzada. Esto nos permite encontrar un valor crítico de la fracción de ocupación inicial, que justo las separa.
- 4.) Al simular este tipo de fenómenos utilizando técnicas de autómatas celulares hay que tener presente el hecho de que el espacio, que en principio es un continuo, ha sido discretizado y que la velocidad de las partículas y densidad reales de las partículas están escaladas a las unidades de la retícula del autómata celular.
- 5.) Adicionalmente, en nuestro modelo el tamaño de las celdas del autómata celular debe ser interpretado como la distancia máxima a la que podría ocurrir una interacción entre las partículas que se mueven en el sistema.
- 6.) A pesar de que han transcurrido ya más de veinte años desde su descubrimiento, todavía no se entiende por qué la agregación limitada por difusión produce objetos fractales [27-30]. Sin duda este es un desafío de la mayor importancia y ha permitido mantener vigente esta fascinante área de investigación.

Agradecimientos

J.G.E. agradece el soporte económico brindado por la Coordinación de Ciencias Exactas y Naturales del Decanato de Investigación de la Universidad Nacional Experimental del Táchira, a través del proyecto Código **No. 04-005-2001**. K.T.K. agradece el apoyo económico otorgado por el C.D.C.H.T. de la Universidad de Los Andes bajo el número **C-1279-04-02-B**.

Referencias bibliográficas

- [1] T. A. Witten and L. M. Sander. *Phys. Rev. Lett.* **47**, 1400 (1981)

- [2] T. A. Witten and L. M. Sander. *Phys. Rev. B*, **27**, 5686 (1983)
- [3] L. Niemeyer, L. Pietronero and H. J. Wiessmann, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 1033 (1984)
- [4] J. Mathiesen, I. Procaccia, H. L. Swinney, and M. Thrasher. Cornell University Library: arXiv:cond-mat/0512274 v1; www.arxiv.org/abs/cond-mat/0512274 (2005)
- [5] D. Grier, E. Ben-Jacob, Roy Clarke, and L. M. Sander. *Phys. Rev. Lett.* **56**, 1264 (1986).
- [6] A. Sornette, P. Davy, and D. Sornette. *Phys. Rev. Lett.* **65**, 2266 (1990)
- [7] M. B. Hastings. *Phys. Rev. Lett.* **87**, 175502 (2001)
- [8] Tang S; Ma Y.; Shiu C. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, **180** (1), 7 (2001)
- [9] K. Jrgen Mly, F. Boger, J. Feder, T. Jssang and P. Meakin; *Phys. Rev. A*, **36**, 318 (1987)
- [10] T. Vicsek, "*Fractal Growth Phenomena*", World Scientific, Singapore, New Jersey, second edition (1992)
- [11] G. Caldarelli, C. Castellano, and A. Vespignani, *Phys. Rev. E* **49**, 2673 (1994)
- [12] G. Mourot, S. Morel, E. Bouchaud, and G. Valentin, *Phys. Rev. E*, **71**, 016136 (2005)
- [13] H. Auradou, M. Zei, E. Bouchaud, *The European Physical Journal B-Condensed Matter*, **44** (3), 365 (2005)
- [14] Wei-Heng Shih, Wan Y. Shih, Seong-Il Kim, Jun Liu, and Ilhan A. Aksay. *Phys. Rev. A*, **42**, 4772 (1990)
- [15] S. Romer, F. Scheffold, and P. Schurtenberger. *Phys. Rev. Lett.* **85**, 4980 (2000)
- [16] Filippov A.V.; Zurita M.; Rosner D.E. *Journal of Colloid and Interface Science*, **229**, 261 (2000)
- [17] E. Ben-Jacob. *Contemporary Physics*, **38** (3), 205 (1997)
- [18] G. Károlyi. *Phys. Rev. E*, **71**, 031915 (2005)

- [19] I. Dogsa, M. Kriechbaum, D. Stopar and P. Laggner. *Biophys. J.* **89**, 2711 (2005)
- [20] M. Kh. Aminian , N. Taghavinial, A. Irajizad, S. M. Mahdavi1, M. Chavoshi and S. Ahmadian. *Nanotechnology*, **17**, 520 (2006)
- [21] Bastien Chopard and Michel Droz, "*Cellular automata modeling of physical systems*", Cambridge University Press (1998)
- [22] El programa PGPLOT puede ser descargado en: **<ftp.astro.caltech.edu/pub/pgplot/pgplot5.2.tar.gz>**. Para las rutinas gráficas, consulte: **www.astro.caltech.edu/~tjp/pgplot**
- [23] Esto es, a todas las escalas a las que podamos contemplarlo, descubrimos que la parte es semejante al todo
- [24] Debido a la inexistencia, en la mayoría de los casos, de una expresión analítica que proporcione $N(\delta)$ en función de δ , lo cual impide el cálculo teórico del límite en (1)
- [25] Russel, D.A., Hanson, J.D., and Ott, E., *Phys. Rev. Lett.* **45**, 1175 (1980)
- [26] El programa HarFa (Harmonic and Fractal Image Analyser) esta disponible en la Internet en la dirección: **www.fch.vutbr.cz/lectures/imagesci** (2001)
- [27] Thomas C. Halsey. *Physics Today*, **36**, November (2000)
- [28] B. Davidovitch, A. Levermann, and I. Procaccia. *Phys. Rev. E*, **62**, R5919 (2000)
- [29] O. Praud and H. L. Swinney. *Phys. Rev. E*, **72**, 011406, (2005)
- [30] V. E. Tarasov. *Phys. Lett. A*, **336**, 167 (2005)